Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U001331

Державний реєстраційний номер: 0123U103492

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-01-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Оптимізація процесів синтезу інтерметалідів магнію та їх термічна обробка. Фазовий склад та структурні дослідження.

Початок етапу: 08.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322616048

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 22010.40

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1292.165

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Метал-гідриди на основі модифікованих сплавів магнію для сучасних високоємних систем накопичення водню

Назва роботи англійською:

Metal hydrides based on modified magnesium alloys for modern high-capacity hydrogen storage systems

Реферат українською:

ЕЛЕКТРОДНІ МАТЕРІАЛИ, ІНТЕРМЕТАЛІЧНІ СПОЛУКИ, КОМПЛЕКСНІ ГІДРИДИ, МАГНІЄВІ СПЛАВИ, МЕТАЛОГІДРИДИ, НАКОПИЧУВАЧІ ВОДНЮ, ХІМІЧНІ ДЖЕРЕЛА СТРУМУ. Об'єкт дослідження – нові матеріали для систем накопичення, зберігання та транспортування водню, для металогідридних хімічних джерел енергії. Мета роботи – створення нових високотехнологічних матеріалів для систем генерування, зберігання та транспортування водню на основі запропонованої концепції максимального розупорядкування високоентропійних інтерметалічних фаз та структурного модифікування, які забезпечать високу сорбційну ємність систем накопичення водню та циклічну стабільність електродів металогідридних акумуляторів. Розроблені матеріали будуть вкрай корисними в повоєнній відбудові України, зокрема в енергетичному секторі. Методи дослідження – рентгенівська порошкова і моно кристальна дифракція, мікроструктурний, локальний рентгеноспектральний аналіз, електрохімічне та газофазне гідрування, розрахунок електронної структури; програмне забезпечення для інтерпретації експериментальних результатів (пакети програм WinCSD, FULLPROF, SHELX97, TB-LMTO-ASA, ZView). Вперше проведено систематичне дослідження магнійвмісних сплавів з метою створення гідрогенсорбційних матеріалів для систем накопичення, зберігання та безпечного транспортування водню, а також виготовлення електродів для металогідридних хімічних джерел електричної енергії. Гідрогенсорбційна ємність розроблених металгідридів сягає 1,8 ваг. %, що на 10-15 % перевищує ємність аналогів (LaNi5), а собівартість є нижчою. Гідрогенсорбційна ємність розроблених комплексних гідридів сягає 9,6 ваг. %, а температура десорбції є на 50-80 оС нижчою у порівнянні із магнієм. Питома енергоємність електродів знаходиться в межах 170-180 Вт•год/кг. Сплави є екологічно чистими, пожежо- та вибухобезпечними.

Реферат англійською:

BATTERIES, COMPLEX HYDRIDES, ELECTRODE MATERIALS, HYDROGEN STORAGE SYSTEMS, INTERMETALLIC COMPOUNDS, MAGNESIUM ALLOYS, METAL HYDRIDES. Research object: new materials for hydrogen accumulation, storage and transportation systems, and metal hydride batteries. Purpose of work: the creation of new high-tech materials for hydrogen generation, storage and transportation systems based on the proposed concept of maximum disordering of high-entropy intermetallic phases and structural modification, which will ensure high sorption capacity of hydrogen storage systems and cyclic stability of electrodes for metal hydride batteries. The developed materials will be extremely useful in the post-war reconstruction of Ukraine, particularly in the energy sector. Research methods: X-ray powder diffraction, X-ray single crystal diffraction, scanning electron microscopy, energy dispersive X-ray spectroscopy, electrochemical and gas-phase hydrogenation, electronic structure calculations; software for interpreting experimental results (WinCSD, FULLPROF, SHELX97, TB-LMTO-ASA, ZView software packages). For the first time, a systematic study of magnesium-containing alloys was carried out to create hydrogen sorption materials for systems of accumulation, storage and safe transportation of hydrogen, as well as the manufacture of electrodes for metal hydride batteries. The hydrogen sorption capacity of the developed metal hydrides reaches 1.8 wt. %, which is 10-15% higher than the capacity of analogues (LaNi5), and the cost is lower. The hydrogen sorption capacity of the developed complex hydrides reaches 9.6 wt. %, and their desorption temperature is 50-80 oC lower compared to magnesium. The specific energy capacity of the electrodes is within 170-180 Wh/kg. Alloys are environmentally friendly, fire- and

explosion-proof.

Індекс УДК: 546, 621.18,002.3-034, 620.22, 548 , 544.6

Коди тематичних рубрик: 31.17.15, 55.36.09.29, 81.09, 31.15.17, 31.15.33

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Павлюк Володимир Васильович

Науковий ступінь: д.х.н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Наукові публікації

Назва НТП англійською: Scientific publications

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Наукові публікації

Галузь застосування: Дослідження і розробки в галузі природничих наук, матеріалознавство

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Наукові публікації: статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних Scopus та/або Web of Science, тези доповідей в матеріалах міжнародних конференцій

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Pavlyuk, N. Crystal structure of the hydrogen storage active phase La12Mg46LiMn / N. Pavlyuk, V. Nytka, V. Kordan, V. Pavlyuk // Z. Krist.-New Cryst. St. – 2023. – Vol. 238(6). – P. 1223–1225. (база даних Scopus, Web of Science, квартиль Q4). https://doi.org/10.1515/ncrs-2023-0416

2. Pavlyuk, N. Synthesis, crystal structure and hydrogenation properties of MgxLi3-xB48-y (x = 1.11, y = 0.40) / N. Pavlyuk, V. Milashius, V. Kordan, V. Pavlyuk // Acta Crystallogr., Sect. E: Crystallogr. Commun. – 2024. – Vol. 80. (база даних Scopus, квартиль Q3). https://doi.org/10.1107/S2056989023009969

3. Pavlyuk, N. Structural and hydrogenation properties of MgT2Al (T = Co, Ni) / N. Pavlyuk, G. Dmytriv, V. Pavlyuk // Coll. Abstr. XV Int. Conf. Cryst. Chem. Intermet. Compd. (Lviv, September 25–27, 2023). – Lviv, 2023. – P. 31.

4. Milashius, V. Compositional and structural refinement of Li–B–C phases / V. Milashius, V. Kordan, V. Pavlyuk // Coll. Abstr. XV Int. Conf. Cryst. Chem. Intermet. Compd. (Lviv, September 25–27, 2023). – Lviv, 2023. – P. 73.

5. Мацько, Е. Синтез та електрохімічне гідрування сполуки Y2Ni17, легованої літієм та магнієм / Е. Мацько, В. Кордан, І. Тарасюк, В. Павлюк // Зб. тез доп. IV Міжнар. наук. конф. «Актуальні проблеми хімії, матеріалознавства та екології». (Луцьк, 7–9 грудня 2023). – Луцьк, 2023. – С. 133–135.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Мельник Володимир Петрович
д. філ. н.

Перелік осіб-виконавців

Вербовицький Юрій Володимирович
(к. х. н., 02.00.01)

Дмитрів Григорій Степанович
(к. х. н., 02.00.01)

Заремба Оксана Іванівна
(к. х. н.)

Зелінська Оксана Ярославівна
(к. х. н., 02.00.01)

Кордан Василь Михайлович
(к. х. н., 02.00.01)

Мілашюс Вікторія Едуардівна

Нитка Віталій Володимирович

Павлюк Назар Володимирович
(д.філософ)

Тарасюк Іван Іванович
(к. х. н., 02.00.01)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Кордан Василь Михайлович

Телефон

+38 (095) 380-70-41

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

